

## ВІДГУК

офіційного опонента доктора фізико-математичних наук, професора **Головацького Володимира Анатолійовича** на дисертацію

**Лешко Ольги Володимирівни** на тему: *«Оптичні властивості сферичних неконцентричних квантових точок типу ядро-оболонка»*, подану на здобуття ступеня доктора філософії в галузі знань 10 «Природничі науки» за спеціальністю 105 «Прикладна фізика та наноматеріали»

### 1. Актуальність теми дисертації

Стрімкий розвиток сучасної оптоелектроніки та нанофотоніки створює нагальну потребу в розробці та дослідженні нових функціональних матеріалів з керованими властивостями. Серед таких матеріалів особливе місце посідають напівпровідникові квантові точки (КТ) типу ядро-оболонка, які завдяки унікальним оптичним та електронним характеристикам стали базовими елементами для створення пристроїв нового покоління.

Дисертаційна робота Лешко Ольги Володимирівни присвячена вирішенню надзвичайно актуальної проблеми сучасної фізики наносистем. Квантові точки типу ядро-оболонка є надзвичайно перспективними для створення високоефективних світлодіодів та люмінесцентних сонячних концентраторів. Найпоширеніший і найдешевший спосіб їх отримання ґрунтується на технології колоїдного синтезу. Але в рамках цієї технології часто утворюються несиметричні структури, в яких ядро зміщене відносно центру оболонки, тобто утворюються сферичні неконцентричні квантові точки типу ядро-оболонка (СНКТЯО). Таке порушення симетрії суттєво впливає на енергетичний спектр носіїв заряду та, як наслідок, на оптичні властивості наноструктури. Відсутність послідовної аналітичної теорії, яка б адекватно описувала електронні, діркові та екситонні стани в таких структурах, є значною науковою проблемою, що стримує цілеспрямований дизайн та оптимізацію відповідних оптоелектронних пристроїв. Саме цю прогалину і заповнює дана дисертаційна робота.

Актуальність обраної теми підтверджується також тим, що дисертаційне дослідження виконувалось у межах планових науково-дослідних тем кафедри фізики та інформаційних систем Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка, зокрема:

1. Кафедральна тема “Отримання та дослідження фізичних властивостей нанокompозитних матеріалів на основі широкозонних напівпровідників” (2022–2025 роки).

2. “Фотополімерні матриці та наноносії при конструюванні біосенсорів для моніторингу стану довкілля та якості питної води” (0121U109539, 2021–2023 рр.).

3. “Вплив зовнішніх полів на синтез, сенсорні властивості квантових точок для медичних застосувань в умовах війни” (0124U001093, 2024–2025 роки).

4. “Біонаноконструкції напівпровідникова квантова точка – протеїн для біомедичних застосувань: синтез, дослідження, характеристика з використанням машинного навчання” (держ. реєстр. номер 0125U002002, 2025-2027 роки).

Така широка інтеграція дослідження у планові наукові теми, що фінансуються державою, беззаперечно підтверджує стратегічну важливість обраного напрямку для розвитку вітчизняної науки в галузі наноматеріалів.

Отже, тема дисертаційної роботи, присвячена теоретичному дослідженню оптичних властивостей сферичних неконцентричних квантових точок типу ядро-оболонка, має високе як фундаментальне, так і практичне значення, відкриваючи нові шляхи для керування характеристиками наноструктур.

## **2. Обґрунтованість основних наукових положень та висновків, сформульованих у дисертації**

Дисертаційна робота Лешко О.В. є завершеним науковим дослідженням, яке містить наукові положення, висновки та рекомендації, що характеризуються високим ступенем обґрунтованості та достовірності.

Достовірність отриманих результатів забезпечується використанням комплексу сучасних та добре апробованих теоретичних методів фізики напівпровідників та наносистем. Зокрема, в роботі застосовано наближення ефективної маси, модель прямокутних потенціальних ям та бар'єрів, метод розкладу за плоскими хвилями та чисельний метод скінченних елементів. Комплексне застосування як аналітичних, так і чисельних підходів забезпечило всебічну верифікацію отриманих результатів та високу надійність висновків.

Важливим підтвердженням достовірності висновків дисертації є добра якісна та кількісна узгодженість отриманих теоретичних результатів з експериментальними даними інших наукових робіт, що стосуються спектрів поглинання та зсуву Стокса в аналогічних наногетероструктурах.

Строга методологічна база дослідження, ретельний аналіз отриманих даних та їх порівняння з відомими експериментальними фактами забезпечують логічність, послідовність та завершеність роботи в цілому.

## **3. Оцінка змісту дисертації, її завершеності в цілому**

Дисертаційна робота Лешко О.В. є кваліфікаційною науковою працею, присвяченою комплексному теоретичному дослідженню впливу параметра

неконцентричності на оптичні властивості СНКТЯО. Робота має логічну та послідовну структуру, викладена грамотною науковою мовою. Вона складається зі вступу, п'яти розділів, висновків, списку використаних джерел із 98 найменувань та додатку. Загальний обсяг дисертації становить 174 сторінки.

У *вступі* обґрунтовано актуальність теми, чітко сформульовано мету роботи – розроблення аналітичної теорії СНКТЯО та визначення впливу параметра неконцентричності на їхні оптичні властивості. Також визначено завдання, наукову новизну та практичне значення одержаних результатів.

У *першому* розділі виконано системний аналіз наукової літератури, що стосується багатошарових сферичних наноструктур. Цей огляд дозволив дисертантці чітко ідентифікувати ключову наукову прогалину – відсутність послідовної теорії, яка б описувала електронні та діркові стани в неконцентричних КТ, що й визначило основний напрям дослідження.

У *другому* розділі дисертантка закладає теоретичний фундамент роботи, пропонуючи оригінальну модель та розвиваючи строгу теорію електронних і діркових станів у СНКТЯО. Особливо варто відзначити обґрунтоване застосування методів розкладу за плоскими хвилями та чисельного методу скінченних елементів, що дозволило не лише розрахувати розщеплення енергетичних рівнів, але й переконливо продемонструвати, що врахування гаусового розподілу за параметром неконцентричності суттєво покращує узгодження з експериментом.

*Третій* розділ присвячено дослідженню більш складних ефектів, а саме спільного впливу водневоподібної донорної домішки та параметра неконцентричності. Дисертантка виявляє та теоретично обґрунтовує тонкі ефекти компенсації, коли протилежно спрямовані зміщення ядра та домішки можуть призводити до чергування виродження та розщеплення енергетичних рівнів та часткового відновлення сферичного розподілу електронної густини.

У *четвертому* розділі, спираючись на розвинуту модель, авторка глибоко аналізує залежність енергії електрон-діркової обмінної взаємодії від параметра неконцентричності. Показано, що характер цієї залежності якісно змінюється залежно від товщини оболонки: від монотонного для тонких до немонотонного для товстих оболонок. Цей важливий результат пояснюється складною динамікою перекриття хвильових функцій носіїв заряду.

*П'ятий* розділ демонструє практичну спрямованість дослідження, аналізуючи спільний вплив зовнішнього електричного поля та параметра неконцентричності. Доведення можливості керування ефективною оптичною

щільною шляхом прикладання поля та відновлення виродження розщеплених рівнів має пряме прикладне значення для розробки оптоелектронних пристроїв з керованими характеристиками.

Дисертація завершується чітко сформульованими висновками, які повністю відповідають поставленим у роботі завданням, логічно впливають зі змісту розділів та свідчать про досягнення поставленої мети.

#### **4. Наукова новизна та її обґрунтованість**

Основні наукові положення дисертаційної роботи, які виносяться на захист, містять наукову новизну, є повністю доведеними, теоретично обґрунтованими та підтвердженими розрахунками. До найбільш значущих результатів належать такі, що отримані вперше:

1. Розвинуто аналітичну теорію електронних і діркових станів у СНКТЯО, що дозволяє адекватно описувати енергетичний спектр носіїв заряду в таких асиметричних наносистемах.

2. Досліджено вплив параметра неконцентричності на оптичний коефіцієнт поглинання СНКТЯО. Встановлено, що врахування дисперсії за цим параметром, змодельованої гаусовим розподілом, дозволяє досягти кращого узгодження теоретичних розрахунків з експериментальними даними.

3. Показано, що наявність донорної домішки у СНКТЯО, зміщеної протилежно до напрямку зміщення ядра, може зумовлювати чергування виродження та розщеплення енергетичних рівнів збуджених електронних станів. За певних конфігурацій спостерігається часткове відновлення сферично-симетричного розподілу електронної густини.

4. Досліджено вплив параметра неконцентричності на величину електрон-діркової обмінної взаємодії у СНКТЯО CdSe/CdS. Виявлено, що залежно від товщини оболонки, залежність енергії взаємодії від зміщення ядра може бути як монотонною (для тонких оболонок), так і немонотонною (для товстих).

5. Встановлено, що прикладанням зовнішнього електричного поля до СНКТЯО можна цілеспрямовано регулювати розмір ефективної оптичної щільності, а також відновлювати виродження енергетичних рівнів, розщеплених через неконцентричність структури.

Ці нові наукові результати є вагомим внеском у фізику наноструктур та відкривають нові можливості для теоретичного опису та практичного застосування квантових точок зі структурними недосконаlostями.

## **5. Теоретична та практична цінність**

Результати, отримані в дисертаційній роботі Лешко О.В., мають значну цінність як для фундаментальної фізики наносистем, так і для прикладних розробок у сфері нанотехнологій та оптоелектроніки.

Теоретична цінність роботи полягає в тому, що розвинута аналітична модель та отримані закономірності становлять вагомий внесок у фундаментальну фізику наносистем, оскільки вперше встановлюють аналітичні закономірності, що пов'язують структурну асиметрію з електронними та оптичними властивостями наногетероструктур. Отримані результати можуть слугувати міцною теоретичною основою для подальшого моделювання більш складних ефектів у СНКТЯО та аналогічних асиметричних наносистемах.

Практичне значення отриманих результатів полягає в тому, що розроблені теоретичні моделі дозволяють не лише пояснювати, але й прогнозувати та цілеспрямовано коригувати оптичні характеристики КТ, що є ключовим для їхнього застосування. Зокрема, результати дисертації можуть бути використані для удосконалення технологій створення світлодіодів шляхом цілеспрямованого керування електрон-дірковими взаємодіями та домішковими станами (розділи 3, 4) для зменшення безвипромінювальних втрат; розробки високоефективних люмінесцентних центрів для сонячних концентраторів, де керування енергетичними рівнями за допомогою структурних параметрів або зовнішніх полів дозволяє підвищити ефективність енергопередачі; конструювання інфрачервоних та терагерцових детекторів. Зокрема, встановлена можливість керування ефективною оптичною щільною та відновлення виродження рівнів за допомогою зовнішнього електричного поля (розділ 5) відкриває прямий шлях до конструювання детекторів із динамічно настроюваною спектральною чутливістю.

Отже, дисертаційна робота має високу наукову цінність, а її результати можуть знайти широке застосування у сучасній промисловості наноматеріалів та оптоелектроніки.

## **6. Зауваження та дискусійні питання**

Високо оцінюючи дисертаційну роботу Лешко О.В. в цілому, вважаю за доцільне висловити декілька зауважень та питань, які мають переважно дискусійний та рекомендаційний характер і не знижують загального позитивного враження від проведеного дослідження.

1. На стор.34 наведено така фраза: «Додавання домішок у неконцентричні КТЯО також суттєво змінює енергетичну структуру, оскільки вони можуть

розташовуватися в енергетично вигідних позиціях у системі». Це речення має декілька недоліків: по-перше, продовження речення після слова оскільки мало б пояснювати першу його частину, але воно цього не робить; по-друге: домішки завжди розміщуються в енергетично вигідних позиціях згідно фундаментального принципу природи.

2. На стор. 35 вказано, що структура КТ може бути однорідною, або гетероструктурою. Насправді, краще говорити про просту та багатошарову квантову точку, оскільки навіть проста КТ вже є гетероструктурою.

3. У таблиці 2.1 числові значення енергій основного стану електрона подано з надмірною кількістю знаків після коми (до восьми десяткових знаків, наприклад 118.74019621 меВ), що не відповідає реальній точності сучасних експериментальних методів. Навіть для демонстрації точності числових розрахунків було б достатньо 3 знаки після коми.

4. Як зазначено в дисертації (стор.75), для моделювання в COMSOL Multiphysics використано тривимірну (3D) розмірність простору. Однак, з огляду на геометрію задачі – сферичну квантову точку типу ядро-оболонка з неконцентричним ядром, зміщеним уздовж осі OZ – система зберігає осесиметрію. Для збереження цієї симетрії середовище матриці можна було б обмежити циліндром, і використати 2D Axisymmetric компонент, який дозволяє значно зменшити обчислювальні ресурси.

5. В дисертації містяться неточності у формулюваннях та описки. Наприклад, на стор.59 (перший абзац) замість «діагоналізації» вжито слово «діалогізації», а на стор. 103 у виразі для площі поверхні КТ пропущено коефіцієнт 4.

Слід наголосити, що висловлені зауваження не є принциповими, не торкаються суті отриманих наукових результатів і жодним чином не знижують високої наукової та практичної цінності дисертаційної роботи.

## **7. Апробація результатів дослідження та їх повнота викладення в опублікованих працях**

Основні результати дисертаційної роботи пройшли широку та всебічну апробацію. За матеріалами дисертації опубліковано 14 наукових праць, з яких: 7 статей у наукових фахових виданнях України та закордонних виданнях, що індексуються в міжнародних наукометричних базах даних Scopus та/або Web of Science; 7 тез доповідей у матеріалах міжнародних та всеукраїнських наукових конференцій.

Отже, кількість та рівень опублікованих праць є цілком достатніми, повною мірою відображають основний зміст дисертаційного дослідження та свідчать про його належну апробацію в науковій спільноті.

#### **8. Дані про відсутність порушень академічної доброчесності**

Аналіз автореферату та електронної версії дисертації не виявив ознак академічного плагіату, фабрикації, фальсифікації чи інших порушень академічної доброчесності. Текст представлених матеріалів дисертації є оригінальним: всі цитати позначені коректно та правильно відображені в списку літератури. Отже, дисертаційну роботу Лешко Ольги Володимирівни слід визнати самостійною та оригінальною науковою працею.

#### **9. Висновок про відповідність дисертації встановленим вимогам**

Дисертаційна робота Лешко Ольги Володимирівни на тему «Оптичні властивості сферичних неконцентричних квантових точок типу ядро-оболонка» є завершеною науковою працею, в якій вирішено важливу наукову задачу – розроблено послідовну аналітичну теорію оптичних властивостей сферичних неконцентричних квантових точок типу ядро-оболонка. Результати дисертації мають важливе теоретичне та практичне значення для прикладної фізики та наноматеріалів. За своєю актуальністю, методологічним рівнем виконання, науковою новизною, обґрунтованістю положень та висновків дисертація відповідає «Вимогам до оформлення дисертації», затверджених наказом МОН України № 40 від 12.01.2017 р. та постанови Кабінету Міністрів України «Про затвердження Порядку присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії», №44 від 12.01.2022 р., а її авторка, Лешко Ольга Володимирівна, заслуговує на присудження ступеня доктора філософії в галузі знань 10 «Природничі науки» за спеціальністю 105 «Прикладна фізика та наноматеріали».

Офіційний опонент:

доктор фізико-математичних наук, професор,  
професор кафедри термоелектрики та медичної фізики  
Чернівецького національного університету  
імені Юрія Федьковича

Володимир ГОЛОВАЦЬКИЙ